

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА

Этап 1. Модель. Презентация по научной
проблеме. Теоретическое описание
задачи. Описание модели.

Работу выполнили студентки НПИбд-02-18

Бурба А. В., Крючкова В. М., Никитаева А. С.,

Фогилева К. М., Шапошникова А. С.

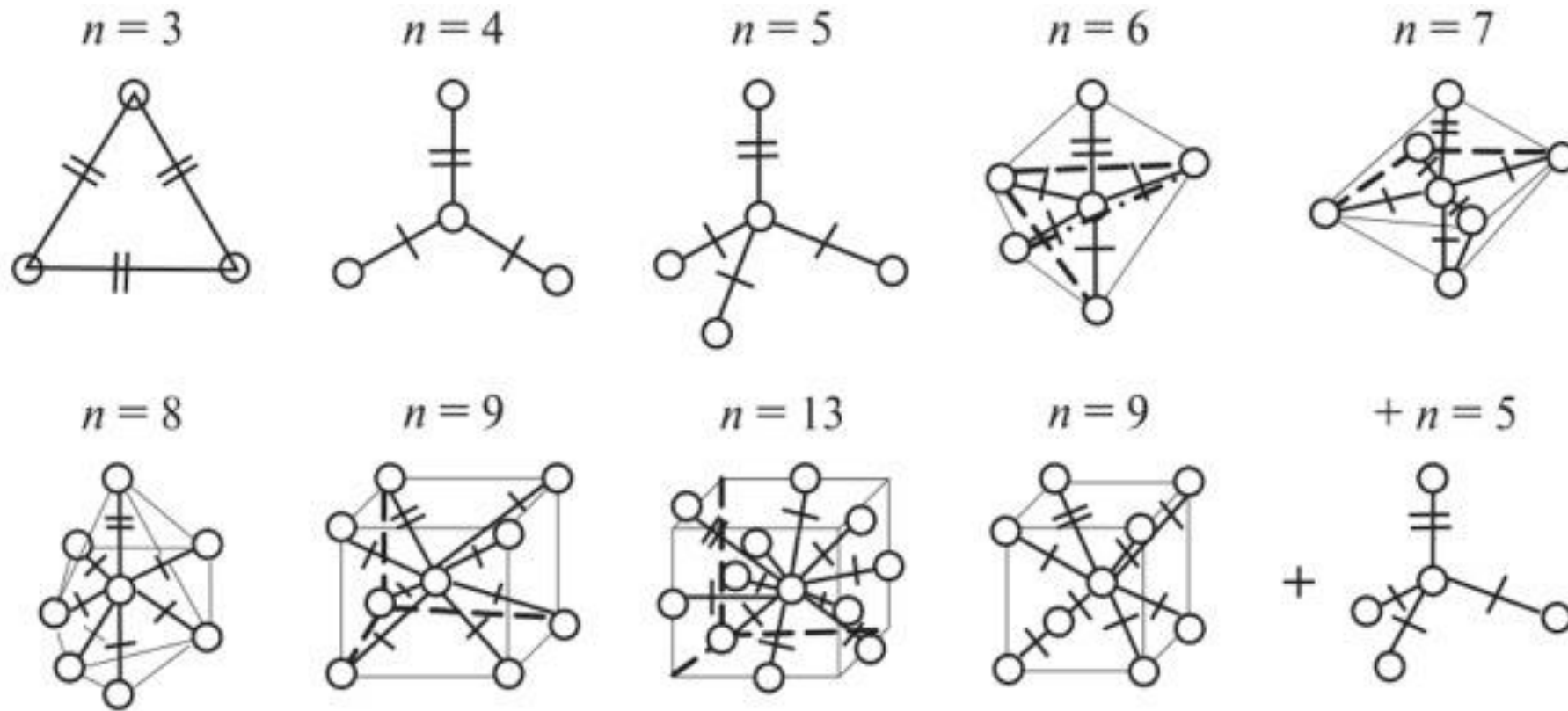
Проблема



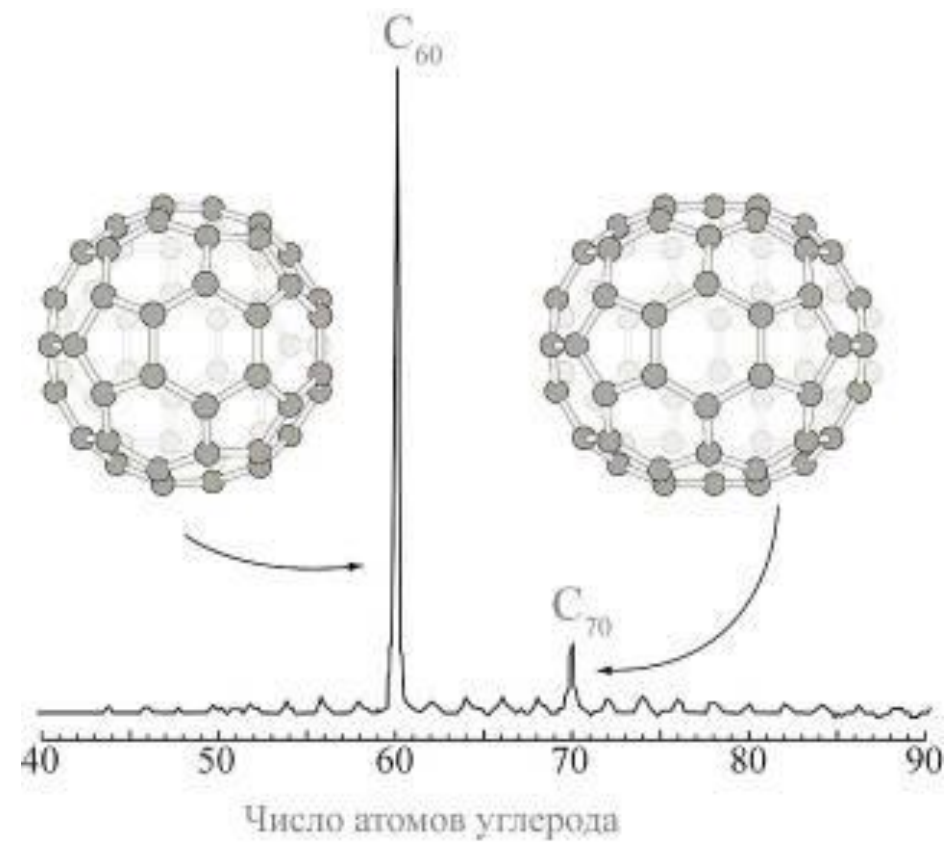
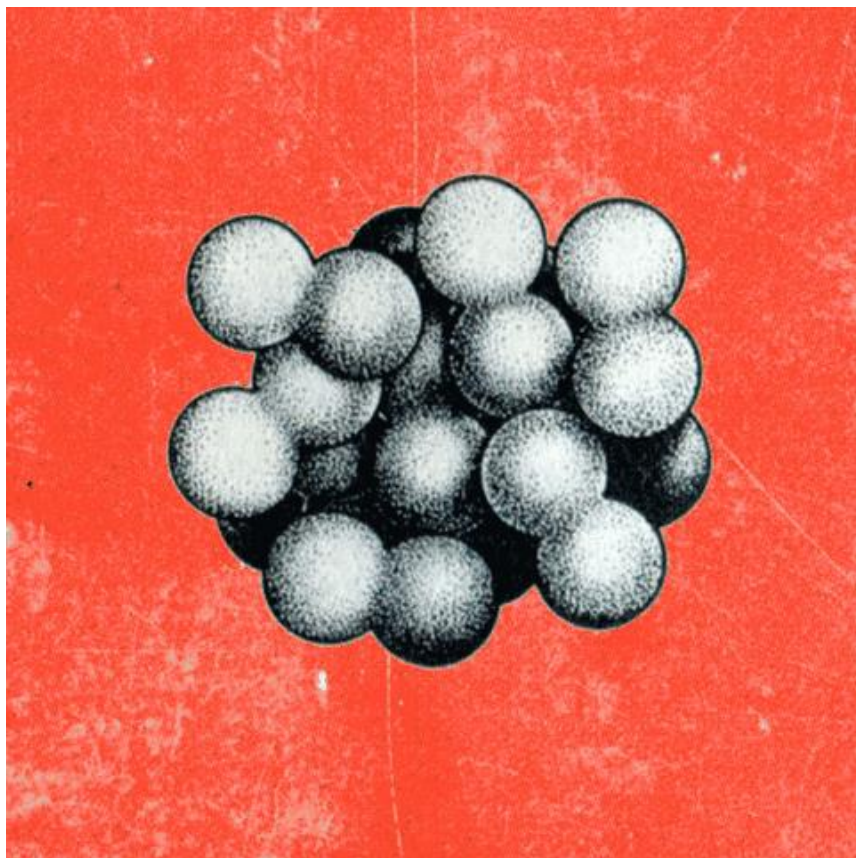
Задачи

1. Взять кластеры с «магическим» числом атомов 7 и 19.
2. Исследовать в двумерной модели плавление этих малых кластеров.
3. Проследить за изменениями энергии атомов кластеров при изменении температуры, используя для этого соответствующие формулы.
4. Составить график изменений зависимости средней температуры от полной энергии одного атома.

Что такое кластер?

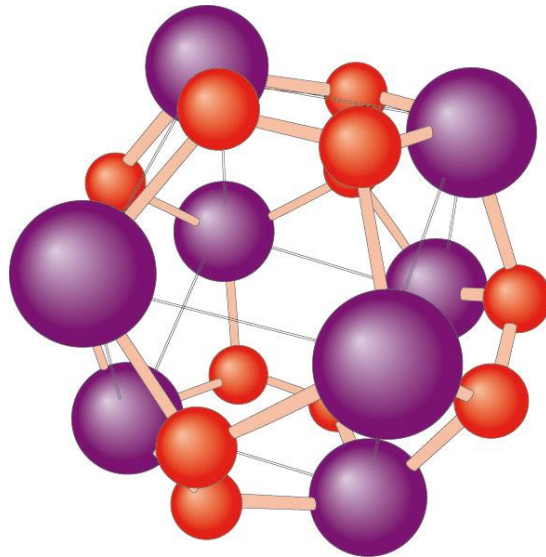


Чуть больше теории



Описание модели

Нормальные условия: давление $p = 0,1013 \text{ МПа} = 760 \text{ мм рт. ст.}$ (нормальная атмосфера) и температурой $273,15 \text{ К}$ (0°C).



**СПАСИБО ЗА
ВНИМАНИЕ!**